

На правах рукописи

Хуснутдинов Рамиль Миннегаязович

similar papers at core.ac.uk

provided by Kazan Federal

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

01.04.02 – теоретическая физика

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Казань - 2008

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования “Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет”.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Юльметьев Ренат Музипович

Научный консультант: кандидат физико-математических наук,
доцент Мокшин Анатолий Васильевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Таюрский Дмитрий Альбертович

доктор физико-математических наук,
профессор Тимашев Сергей Федорович

Ведущая организация: Казанский физико-технический институт
им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН

Защита состоится “21” февраля 2008 года в 14³⁰ на заседании диссертационного совета Д 212.081.15 при Казанском государственном университете имени В.И. Ульянова-Ленина по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета.

Автореферат разослан “ ” 2008 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук, профессор

Еремин М.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Изучение динамических процессов в неупорядоченных системах относится к актуальным проблемам современной статистической физики и физики конденсированного состояния вещества.

Жидкости, расплавы, плотная плазма и ряд других плотных систем, характеризующихся отсутствием упорядоченной структуры, обладают рядом специфических свойств. В них средняя кинетическая энергия, приходящаяся на одну частицу, по порядку величины равна потенциальной энергии. Отсутствие малого параметра, по которому было бы удобно проводить разложение, приводит к тому, что для жидкостей и расплавов нет такой же строгой теории, как, например, для твердых тел и газов.

Несмотря на то, что в последнее время в изучении плотных неупорядоченных систем достигнуты большие успехи, особенно в изучении физики явлений в простых жидкостях, теоретические исследования в этой области еще далеки от той точности, которая достигнута в эксперименте. Более того, многие качественные результаты, полученные в физике простых жидкостей, как правило, опираются на данные, получаемые методом молекулярной динамики (МД). Метод МД впервые был предложен и реализован Олдером и Уэйнрайтом в конце пятидесятих годов двадцатого столетия для изучения движения систем твердых сфер. В течение ряда лет этот метод интенсивно развивался и в последние годы широко применяется для исследования термодинамических и транспортных свойств плотных систем. При этом он удачно дополняет метод Монте-Карло, когда речь идет об изучении термодинамических свойств, и является единственным численным методом, позволяющим изучать динамику плотных сред.

Цель работы состоит в исследовании свойств структуры и динамических процессов неупорядоченных конденсированных сред вблизи критических точек: температур плавления в жидких поливалентных металлах и точек стеклования в стеклообразующих системах.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Изучена микроскопическая структура и коллективная динамика частиц жидких поливалентных металлов на основе новейших теоретических подходов и компьютерного моделирования молекулярной динамики с помощью парных и многочастичных потенциалов межчастичного взаимодействия. Такого рода исследования были выполнены впервые.

2. На основе метода рекуррентных соотношений развита теория структурной релаксации флуктуации плотности жидких поливалентных металлов.

3. Для эргодических стационарных систем в рамках данной теории получено выражение для динамического структурного фактора, содержащее микроскопические параметры частиц жидкости.

4. Показано, что развитая теория хорошо согласуется с гидродинамической теорией, а также применима к области высоких значений волновых чисел k , так называемой области “свободного пробега”.

5. Установлено, что высокочастотные звуковые возбуждения, возникающие на микроскопических пространственных масштабах в жидкостях определяются, главным образом, двух-, трех- и четырехчастичными функциями распределения.

6. Разработана теория структурной релаксации флуктуации плотности числа частиц для переохлажденных жидкостей и стекол на основе идеи о разделении динамических переменных по различным вкладам (быстрым, медленным, их взаимодействиям и т.д.), в рамках формализма функций памяти Цванцига-Мори. С помощью идей Боголюбова об иерархии времен релаксаций и о сокращенном описании статистических систем были найдены функции памяти, играющие существенную роль в динамике неупорядоченных стекольных систем.

7. На основе развиваемого подхода получено выражение для динамического структурного фактора для неэргодических стекольных систем.

8. Выполнено исследование быстрых и медленных процессов в динамике неупорядоченных конденсированных систем.

9. Подтверждена гипотеза о том, что динамические процессы и связанные с ними коллективные возбуждения, которые наблюдаются в терагерцовой области частотных спектров динамического структурного фактора, имеют единую природу как для жидкого, так и для стекольного состояний вещества.

10. Установлено, что в отличие от ширины высокочастотных пиков динамического структурного фактора, которая практически не зависит от температуры, частота этих пиков обнаруживает выраженную температурную зависимость, которая хорошо описывается развитой теорией.

Научная ценность и практическая значимость состоит в выполнении численных расчетов с помощью метода молекулярной динамики структурных и динамических свойств неупорядоченных конденсированных систем вблизи критических точек, а также в разработке теоретических подходов для описания динамических процессов эргодического и неэргодического характера в исследуемых системах. Развитые подходы позволяют объяснить равновесные и неравновесные свойства жидких поливалентных металлов вблизи температур плавления и стеклообразующих систем вблизи точек стеклования.

Положения, выносимые на защиту:

1. Теория структурной релаксации флуктуации плотности числа частиц жидких поливалентных металлов.

2. Теоретический подход к описанию динамических, коллективных процессов в неэргодических стекольных системах.

3. Результаты компьютерного моделирования молекулярной динамики жидких поливалентных металлов и стеклообразующих систем.

4. Универсальная k -зависимость дисперсии коллективных возбуждений в жидких металлах, переохлажденных жидкостях и стек-

лах.

Апробация работы. Основные материалы диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: втором всероссийском семинаре “Флуктуации и шум в сложных системах” (г. Казань, КГПУ, 2003); третьей всероссийской конференции “Необратимые процессы в природе и технике” (г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2005); третьей международной научной конференции “Фундаментальные проблемы физики” (г. Казань, КГУ, 2005); XIII республиканской научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов “Физика конденсированного состояния” (Белоруссия, г. Гродно, ГрГУ, 2005); XIV республиканской научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов “Физика конденсированного состояния” (Белоруссия, г. Гродно, ГрГУ, 2006); V уральской региональной научно-практической конференции “Современные проблемы физики и физико-математического образования” (г. Уфа, БГПУ, 2006); XIX международном симпозиуме “Упорядочение в металлах и сплавах” (г. Ростов-на-Дону, НИИФ РГУ, 2006); четвертой всероссийской конференции “Необратимые процессы в природе и технике” (г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007); международном молодежном научной форуме “Ломоносов-2007” (г. Москва, МГУ им. М.В. Ломоносова, 2007); тринадцатой международной конференции по жидким и аморфным металлам “LAM-XIII” (г. Екатеринбург, Уральское отделение Российской Академии Наук, 2007), а также на научных семинарах кафедр теоретической физики ТГГПУ (КГПУ) и ЕГПУ.

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (№ 05-02-16639-а) и Министерством образования и науки РФ (№ РНП 2.1.1.741).

Публикации. По теме диссертационной работы опубликованы 20 печатных работ, из них 4 статьи в центральной научной печати, 6 статей в сборниках научных работ, включая 1 электронное издание, 10 тезисов докладов на всероссийских и зарубежных конференци-

ях. Одна статья принята к опубликованию в центральной научной печати.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 157 страницах, включая 23 рисунка, 2 таблицы и списка литературы из 154 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении аргументируется актуальность исследуемой проблемы, обосновывается научная и практическая значимость работы, формулируются цель исследования и положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору методов компьютерного моделирования в физике неупорядоченных конденсированных сред. Приводится обзор основных положений метода молекулярной динамики, рассмотрены модельные потенциалы межчастичного взаимодействия и алгоритмы вычислительного эксперимента для различных ансамблей. Кратко рассмотрены методы квантово-механического моделирования *ab-initio* и моделирования методом Монте-Карло. В этой же главе представлены основные схемы анализа результатов по компьютерному моделированию для равновесных структурных и динамических характеристик.

Во второй главе представлен обзор теоретических методов исследования в физике неупорядоченного конденсированного состояния вещества. Особое внимание уделяется двум теоретическим формализмам: формализму функций памяти Цванцига-Мори и формализму рекуррентных соотношений Ли. Детально рассматриваются проблемы о замыкании бесконечной цепочки кинетических уравнений (КУ), полученных на основе техники проекционных операторов; способы решений этих КУ с помощью перехода к марковскому пределу; приближения модельными функциями и подход, основанный на идеях Боголюбова, а также представлены методы получе-

ния точных решений на основе техники рекуррентных соотношений. В качестве применения формализма функций памяти рассматривается теория взаимодействующих мод, развитая для описания динамических процессов в переохлажденных жидкостях и стеклах. На основе техники рекуррентных соотношений Ли и экспериментально-го подтверждения идеи о выравнивании релаксационных параметров ($\Delta_n(k) \approx \Delta_{n+1}(k)$, где $n = 4, 5, 6, \dots$) развит новый теоретический подход для описания динамических процессов в жидких поливалентных металлах. В рамках данного подхода получено следующее выражение для динамического структурного фактора жидких поливалентных металлов:

$$\begin{aligned}
S(k, \omega) &= \frac{S(k)}{2\pi} \frac{\Delta_1(k)\Delta_2(k)\Delta_3(k)}{\Delta_4(k) - \Delta_3(k)} \frac{[4\Delta_4(k) - \omega^2]^{1/2}}{\omega^6 + \mathcal{A}_1(k)\omega^4 + \mathcal{A}_2(k)\omega^2 + \mathcal{A}_3(k)}, \\
\mathcal{A}_1(k) &= \frac{\Delta_3^2(k) - \Delta_2(k)[2\Delta_4(k) - \Delta_3(k)]}{\Delta_4(k) - \Delta_3(k)} - 2\Delta_1(k), \\
\mathcal{A}_2(k) &= \frac{1}{\Delta_4(k) - \Delta_3(k)} \left(\Delta_2^2(k)\Delta_4(k) - 2\Delta_1(k)\Delta_3^2(k) + \right. \\
&\quad \left. \Delta_1(k)\Delta_2(k)[2\Delta_4(k) - \Delta_3(k)] \right) + \Delta_1^2(k), \\
\mathcal{A}_3(k) &= \frac{\Delta_1^2(k)\Delta_3^2(k)}{\Delta_4(k) - \Delta_3(k)}. \tag{1}
\end{aligned}$$

Релаксационные параметры $\Delta_n(k)$ (где $n = 1, 2, 3, \dots$) связаны с частотными моментами динамического структурного фактора $S(k, \omega)$

$$\omega^{(p)}(k) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \omega^p S(k, \omega) d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} S(k, \omega) d\omega} \tag{2}$$

следующими соотношениями:

$$\begin{aligned}
\omega^{(2)}(k) &= \Delta_1(k), \\
\omega^{(4)}(k) &= \Delta_1^2(k) + \Delta_1(k)\Delta_2(k), \\
\omega^{(6)}(k) &= \Delta_1(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k)]^2 + \Delta_1(k)\Delta_2(k)\Delta_3(k), \\
\omega^{(8)}(k) &= \Delta_1(k)\{[\Delta_1(k) + \Delta_2(k)]^3 + 2\Delta_2(k)\Delta_3(k)\}
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
& \times [\Delta_1(k) + \Delta_2(k)] + \Delta_2(k)\Delta_3^2(k)\} \\
& + \Delta_1(k)\Delta_2(k)\Delta_3(k)\Delta_4(k), \\
\omega^{(10)}(k) = & \Delta_1(k)\{\Delta_1(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k)]^3 \\
& + \Delta_1(k)\Delta_2(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k)] \\
& \times [\Delta_1(k) + \Delta_2(k) + \Delta_3(k)] \\
& + \Delta_2(k)\Delta_3(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k) + \Delta_3(k)] \\
& \times [\Delta_1(k) + \Delta_2(k) + \Delta_3(k) + \Delta_4(k)] \\
& + \Delta_2^2(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k) + \Delta_3(k)]^2 \\
& + \Delta_1(k)\Delta_2(k)\Delta_3(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k)] \\
& + \Delta_2(k)\Delta_3(k)\Delta_4(k)[\Delta_1(k) + \Delta_2(k) \\
& + \Delta_3(k) + \Delta_4(k) + \Delta_5(k)]\}, \\
& \dots
\end{aligned}$$

На рис. 1 представлены частотные спектры интенсивности рассеяния в жидком алюминии при температуре $T = 1000$ К для четырех значений волнового числа, полученные с помощью компьютерного моделирования молекулярной динамики и теоретических расчетов (сплошная линия) с учетом экспериментальной функции разрешения

$$\begin{aligned}
I(k, \omega) &= E(k) \int R(k, \omega - \omega') S_q(k, \omega') d\omega', \\
S_q(k, \omega) &= \frac{\hbar\beta\omega}{1 - e^{-\hbar\beta\omega}} S(k, \omega)
\end{aligned} \tag{4}$$

в сравнении с экспериментальными данными по неупругому рассеянию рентгеновских лучей (кружочки)¹. Здесь $S_q(k, \omega)$ – квантовый динамический структурный фактор, $\beta = 1/(k_B T)$ – обратная температура, $E(k)$ – нормировочный множитель и $R(k, \omega)$ – экспериментальная функция разрешения.

¹Scopigno T. Collective dynamics of liquid aluminum probed by inelastic x-ray scattering / T. Scopigno, U. Balucani, G. Ruocco, and F. Sette // Phys. Rev. E. 2000. - Vol. 63, № 1. - P. 011210 (1-7).

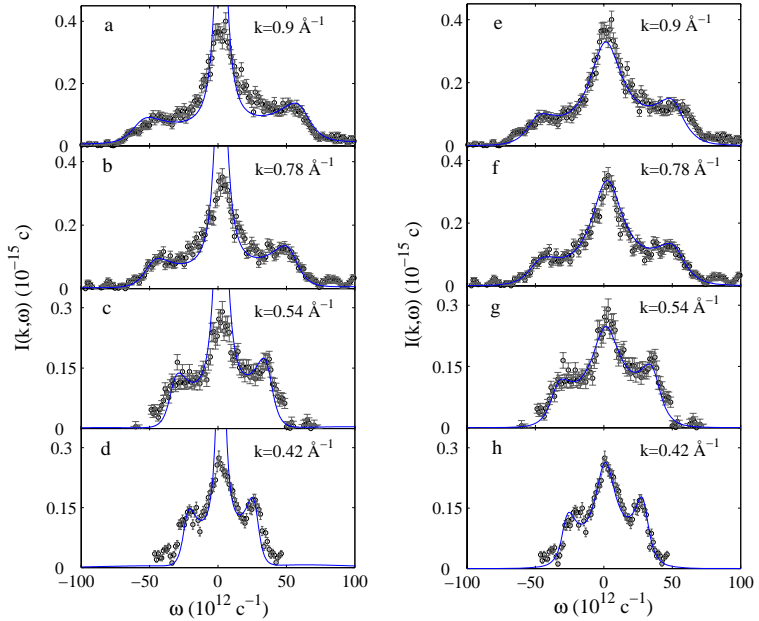


Рис. 1: Частотные спектры интенсивности рассеяния $I(k, \omega)$ в жидком алюминии при температуре $T = 1000\text{K}$ для различных значений волнового числа k : (слева) – сплошной линией обозначены результаты компьютерного моделирования молекулярной динамики; (справа) – теоретические расчеты, выполненные по формуле (1) с учетом экспериментальной функции разрешения (4); кружочками обозначены экспериментальные данные по неупругому рассеянию рентгеновских лучей.

В третьей главе представлены результаты исследования структурных и динамических свойств жидких поливалентных металлов (Al , Mg , Pb) вблизи температур плавления с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики на основе парных и многочастичных потенциалов межчастичного взаимодействия. Здесь же обсуждаются вопросы, связанные с влиянием многочастичных взаимодействий на статические (структурные) и динамические характеристики жидких поливалентных металлов. Также в данной

главе представлен детальный анализ результатов компьютерного моделирования молекулярной динамики для динамических характеристик с помощью новейших теоретических подходов.

В четвертой главе представлен новый теоретический подход к описанию динамических процессов в переохлажденных жидкостях и стеклах, основанный на идее разделения динамических переменных по различным вкладам (быстрым, медленным, их взаимодействиям и др.) в рамках формализма функций памяти Цванцига-Мори.

Для исходной динамической переменной W_0 можно записать временную эволюцию в виде уравнения Лиувилля

$$\frac{dW_0(t)}{dt} = i\hat{\mathcal{L}}W_0(t), \quad (5)$$

где $\hat{\mathcal{L}} = -i\hat{L}$ – оператор Лиувилля статистической системы

$$\hat{L} = \sum_{j=1}^N \frac{\vec{p}_j \vec{\nabla}_j}{m} - \sum_{i>j=1}^N \vec{\nabla}_j U(\vec{r}_{j,i}) \left(\vec{\nabla}_j \vec{p}_j - \vec{\nabla}_i \vec{p}_i \right). \quad (6)$$

Здесь $U(\vec{r}_{j,i})$ – парный потенциал межчастичного взаимодействия частиц с номерами j и i , \vec{p}_i – импульс i -ой частицы.

Лиувиллиан $\hat{\mathcal{L}}$ в уравнении (5) можно представить в виде вкладов, характеризующих релаксационные процессы различных временных масштабов (быстрые и медленные переменные, их взаимодействия и др.)

$$\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}_F + \hat{\mathcal{L}}_S + \hat{\mathcal{L}}_{FS} + \hat{\mathcal{L}}_R. \quad (7)$$

Далее с помощью процедуры ортогонализации Грама-Шмидта

$$\langle W_n^*, W_m \rangle = \delta_{n,m} \langle |W_n|^2 \rangle \quad (8)$$

можно найти динамические переменные старших порядков

$$\begin{aligned} W_1(t) &= \hat{\mathcal{L}}W_0(t), \\ W_2(t) &= \hat{\mathcal{L}}W_1(t) - \Omega_1^2 W_0(t), \\ W_3(t) &= \hat{\mathcal{L}}W_2(t) - \Omega_2^2 W_1(t), \\ &\dots, \end{aligned} \quad (9)$$

или в скейлинговом представлении

$$\begin{aligned}
W_1 &= W_1 \{W_1^F, W_1^S, W_1^{FS}, W_1^R\}, \\
W_2 &= W_2 \{W_2^F, W_2^S, W_2^{FS}, W_2^R\}, \\
W_3 &= W_3 \{W_3^F, W_3^S, W_3^{FS}, W_3^R\}, \\
&\dots
\end{aligned} \tag{10}$$

С помощью техники проекционных операторов Цванцига-Мори для временных корреляционных функций (функции памяти)

$$M_j(t) = \frac{\langle W_j^*(0)W_j(t) \rangle}{\langle W_j^*(0)W_j(0) \rangle}, \quad j = 0, 1, 2, \dots \tag{11}$$

можно построить цепочку интегро-дифференциальных уравнений немарковского типа:

$$\begin{aligned}
\frac{dM_j(t)}{dt} &= -\Omega_{j+1}^2 \int_0^t d\tau \left[c_{j+1}^F M_{j+1}^F(\tau) + \right. \\
&\quad \left. c_{j+1}^S M_{j+1}^S(\tau) + c_{j+1}^{FS} M_{j+1}^{FS}(\tau) + c_{j+1}^R M_{j+1}^R(\tau) \right] M_j(t - \tau), \\
j &= 0, 1, 2, \dots
\end{aligned} \tag{12}$$

С помощью идей Боголюбова об иерархии времен релаксаций и о сокращенном описании статистических систем были найдены корреляционные функции (функции памяти), играющие существенную роль в динамике неупорядоченных стекольных систем

$$\begin{aligned}
M_2'(k, \omega) &= \frac{2\Omega_3^2(k)\Omega_4^2(k)\sqrt{4\Omega_4^2(k) - \omega^2}}{\Omega_3^4(k)[4\Omega_4^2(k) - \omega^2] + \omega^2[2\Omega_4^2(k) - \Omega_3^2(k)]^2}, \\
M_2''(k, \omega) &= -\frac{2\omega\Omega_4^2(k)[2\Omega_4^2(k) - \Omega_3^2(k)]}{\Omega_3^4(k)[4\Omega_4^2(k) - \omega^2] + \omega^2[2\Omega_4^2(k) - \Omega_3^2(k)]^2}.
\end{aligned}$$

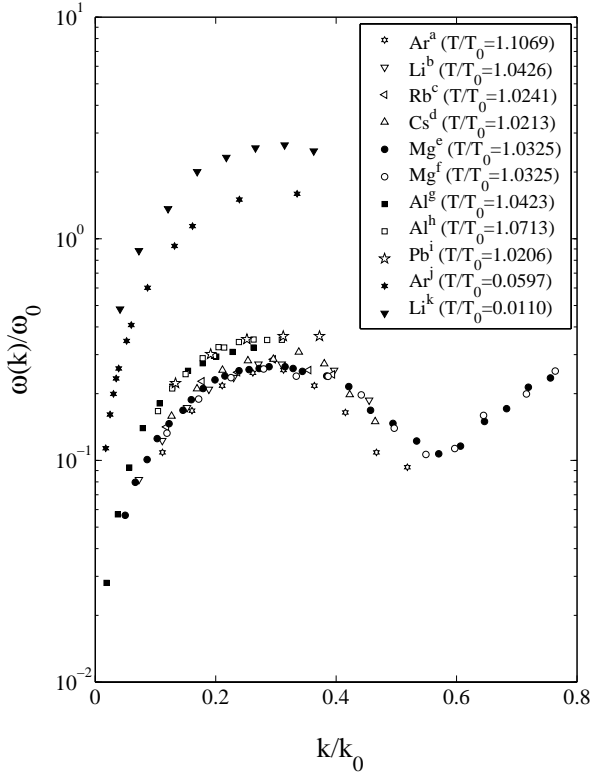


Рис. 2: Дисперсия коллективных возбуждений в приведенных единицах. В качестве масштабных единиц взяты волновое число, соответствующее атомарному радиусу r_0 : $k_0 = 2\pi/r_0$, и частота, соответствующая тепловым колебаниям частиц, находящихся в системе при температуре плавления T_0 : $\omega_0 = 2\pi k_0(m/k_B T_0)^{-1/2}$.

В качестве приложения данного подхода выполнен анализ спектров динамического структурного фактора

$$S(k, \omega) = S(k) \left[f(k) \delta(\omega) + \frac{1 - f(k)}{\pi} \times \frac{[\Omega_1^2(k) + \Omega_2^2(k)] M_2'(k, \omega)}{[\omega^2 - \Omega_1^2(k) + \omega \Omega_2^2(k) M_2''(k, \omega)]^2 + [\omega \Omega_2^2(k) M_2'(k, \omega)]^2} \right], \quad (13)$$

стекольного аргона вблизи температуры стеклования. Показано, что динамические процессы и связанные с ними коллективные возбуждения, которые наблюдаются в терагерцовой области частотных спектров динамического структурного фактора, имеют единую природу как для жидкого, так и для стекольного состояний вещества. Одним из важных результатов данной главы является обнаружение влияния электронного вклада в жидких металлах и эффекта “структурного ареста” в переохлажденных жидкостях и стеклах на микроскопические коллективные процессы (см. рис. 2). Также обнаружено уменьшение периода колебаний акустических (коллективных) возбуждений в спектрах $S(k, \omega)$ при переходе системы из жидкого в стекольное состояние.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. На основе метода рекуррентных соотношений и идеи о выравнивании частотных релаксационных параметров развита теория структурной релаксации флуктуации плотности числа частиц жидких поливалентных металлов.

2. Получено выражение для динамического структурного фактора, численные расчеты которого проведены для жидких поливалентных металлов. Обнаружено убедительное согласие теоретических результатов с новейшими экспериментальными данными по неупругому рассеянию рентгеновских лучей, а также с данными по компьютерному моделированию молекулярной динамики.

3. Установлено, что коллективная динамика частиц жидкости, главным образом, определяется двух-, трех- и четырехчастичными функциями распределения.

4. В рамках формализма функций памяти Цванцига-Мори и идеи разделения динамических переменных по различным вкладам (быстрым и медленным переменным, их взаимодействиям и др.) развита теория структурной релаксации флуктуации плотности числа частиц для неэргодических стекольных систем. С помощью идей Бо-

голюбова об иерархии времен релаксаций и сокращенного описания статистических систем найдены функции памяти, играющие существенную роль в динамике неупорядоченных стекольных систем. На основе данного подхода получено выражение для динамического структурного фактора переохлажденных жидкостей и стекол. Выполнены соответствующие численные расчеты для аргонового стекла на широком интервале значений волновых векторов, а также приведено сравнение с результатами компьютерного моделирования молекулярной динамики.

5. Установлена универсальная зависимость дисперсии коллективных возбуждений в жидких металлах, переохлажденных жидкостях и стеклах. Обнаружено влияние электронного вклада в жидких металлах и эффекта “структурного ареста” в переохлажденных жидкостях и стеклах на микроскопические коллективные процессы.

Основное содержание диссертации опубликовано в следующих работах:

1. Mokshin A.V. Analysis of the dynamics of liquid aluminium: recurrent relation approach / A.V. Mokshin, R.M. Yulmetyev, R.M. Khusnutdinoff, and P. Hänggi // J. Phys.: Condens. Matter. - 2007. - Vol. **19**, - P. 046209 (1-16).
2. Мокшин А.В. Коллективная динамика жидкого алюминия вблизи температуры плавления: теория и компьютерное моделирование / А.В. Мокшин, Р.М. Юльметьев, Р.М. Хуснутдинов, П. Хангги // ЖЭТФ. - 2006. - Том **130**, - С. 974-983.
3. Mokshin A.V. Self-consistent approach in the microdynamics description of supercooled liquids and glasses / A.V. Mokshin, R.M. Yulmetyev, R.M. Khusnutdinov, and P. Hänggi // ФТТ. - 2006. - Том **48**, - С. 1662-1665.
4. Мокшин А.В. Микроскопическая высокочастотная динамика в

- стеклах / А.В. Мокшин, Р.М. Юльметьев, Р.М. Хуснутдинов, П. Хангги // Химическая Физика. - 2007. - Том **26**, - С. 5-10.
5. Хуснутдинов Р.М. Микроскопическая структура и динамика жидкого магния: компьютерное моделирование / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев и В.Ю. Шурыгин // Электронный журнал: Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы. - 2006. - Том **9**, - С. 1-4.
 6. Yulmetyev R.M. Non-markov statistical effects of X-ray emission intensity of the microquasar Grs 1915+105 / R.M. Yulmetyev, S.A. Demin, R.M. Khusnutdinov, O. Yu. Panishev, and P. Hänggi // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. - 2006. - Vol.**9:4**, - P. 313-330.
 7. Юльметьев Р.М. Исследование высокочастотной динамики частиц в жидком магнии с помощью формализма функции памяти и компьютерного моделирования / Р.М. Юльметьев, Р.М. Хуснутдинов // Расплавы. - 2008. (принята к печати).
 8. Yulmetyev R.M. Dynamic processes in supercooled liquids and glasses / R.M. Yulmetyev, A.V. Mokshin, and R.M. Khusnutdinov // Thirteenth International Conference On Liquid and Amorphous Metals *LAM-XIII*. - Ekaterinburg, 2007. - С.109.
 9. Shurygin V.Yu. Microscopic dynamics of liquid magnesium / V.Yu. Shurygin, R.M. Yulmetyev, and R.M. Khusnutdinov // Thirteenth International Conference On Liquid and Amorphous Metals *LAM-XIII*. - Ekaterinburg, 2007. - С.145.
 10. Хуснутдинов Р.М. Компьютерное моделирование стекольного перехода / Р.М. Хуснутдинов // Сборник тезисов конференции *Фундаментальные проблемы физики*. - КГУ, Казань, 2005. - С.195.

11. Мокшин А.В. Релаксационные масштабы и мера немарковости / А.В. Мокшин, Р.М. Юльметьев и Р.М. Хуснутдинов // Вестник Казанского государственного педагогического университета. - 2005. - Том 4, - С. 11-16.
12. Хуснутдинов Р.М. Компьютерное моделирование молекулярной динамики жидкого алюминия: коэффициент самодиффузии / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев, В.Ю. Шурыгин и Р.Н. Ильина // Вестник Татарского государственного гуманитарно-педагогического университета. - 2006. - Том 7, - С. 48-54.
13. Хуснутдинов Р.М. Компьютерное моделирование микроскопической структуры и динамики частиц в жидком магнии / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев, В.Ю. Шурыгин и Р.Н. Ильина // Вестник Татарского государственного гуманитарно-педагогического университета. - 2006. - Том 7, - С. 54-59.
14. Хуснутдинов Р.М. Коллективная динамика частиц в жидком свинце: теория и моделирование методом молекулярной динамики / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев, В.Ю. Шурыгин и Р.Н. Ильина // Вестник Татарского государственного гуманитарно-педагогического университета. - 2006. - Том 7, - С. 60-65.
15. Хуснутдинов Р.М. Динамические процессы в жидком алюминии вблизи точки плавления: теория и компьютерное моделирование / Р.М. Хуснутдинов // Сборник тезисов XIV международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых *Ломоносов-2007*. - МГУ, Москва, 2007. - С.189-190.
16. Хуснутдинов Р.М. Микроскопический подход к описанию динамических процессов в переохлажденных жидкостях и стеклах / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев и А.В. Мокшин // Сборник тезисов конференции *Необратимые процессы в природе и технике*. - МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 2007. - С.52-54.

17. Хуснутдинов Р.М. Исследование радиальной функции распределения аргона в жидкой и аморфной фазе методом молекулярной динамики / Р.М. Хуснутдинов, В.Ю. Шурыгин // Сборник тезисов конференции *Необратимые процессы в природе и технике*. - МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 2005. - С.103-105.
18. Хуснутдинов Р.М. Немарковские особенности стекольного перехода / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев и В.Ю. Шурыгин // Сборник тезисов конференции *Физика конденсированного состояния*. - ГрГУ, Гродно, 2005. - С.246-250.
19. Хуснутдинов Р.М. Высокочастотная динамика частиц в жидком алюминии / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев и В.Ю. Шурыгин // Сборник тезисов конференции *Физика конденсированного состояния*. - ГрГУ, Гродно, 2006. - С.290-293.
20. Хуснутдинов Р.М. Микроскопическая структура и динамика жидкого магния: компьютерное моделирование / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев и В.Ю. Шурыгин // Труды конференции *Упорядочение в металлах и сплавах*. - Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2006. - С.203-206.
21. Хуснутдинов Р.М. Компьютерное моделирование молекулярной динамики жидкого алюминия / Р.М. Хуснутдинов, Р.М. Юльметьев и В.Ю. Шурыгин // Сборник тезисов *Двенадцатой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых ВНКСФ-12*. - Новосибирск, 2006. - С.335-336.